

一类碳纳米管状图的 Tutte 多项式

李爱民 姜广峰*

(北京化工大学 理学院, 北京 100029)

摘 要: 给出了一类管状图的 Tutte 多项式的一个算法, 这类图的形状与碳纳米管类似。找到了这类图在删除—限制算法中的基图, 用基图的 Tutte 多项式给出了管状图的 Tutte 多项式的递推公式, 用 Maple 实现了管状图的 Tutte 多项式的计算。

关键词: 碳纳米管状图; Tutte 多项式; Maple 程序

中图分类号: O157

引 言

Tutte 多项式是关于图的多项式, 它是由 Tutte 在 1954 建立。早期时, Tutte 称它为双变量多项式, 后来人们称它为图 G 的 Tutte 多项式。

Tutte 多项式包含图的很多信息^[1-3]。例如, 若变量 (x, y) 取一些固定的值^[1-2], 可以得到生成树的个数、森林的个数、连通生成子图的个数等等。通过对 (x, y) 的替换还可得到图 G 的着色多项式, 流多项式, 可靠性多项式等等。除了图论, Tutte 多项式还应用于拟阵论、统计力学、网络技术等。

然而, 一般情况下, Tutte 多项式的计算是非常困难的。目前, 已经计算出圈, 重边, 完全图^[4], n -秩轮图^[5]的 Tutte 多项式, 文献[6]研究了两类递归集合图的 Tutte 多项式。作为着色多项式的深入研究, 文献[7]研究了双着色多项式。

本文研究了一类碳纳米管状图的 Tutte 多项式。

1 Tutte 多项式

图 $G = (V, E)$, 其中 $V = \{v_1, \dots, v_n\}$ 称为顶点集, $E = \{e = (v_i, v_j) \mid v_i, v_j \in V\}$ 叫边集。 e_1, \dots, e_k 是图 G 中边的集合, 其中 $e_i = (v_i, w_i)$, $1 \leq i \leq k$, 如果 $1 \leq i \leq k-1$ 时, $w_i = v_{i+1}$, $w_k = v_1$, 且当 $i \neq j$ 时, $v_i \neq v_j$, 此时称图 G 边的集合 e_1, \dots, e_k 为 1 个圈。1 个边的

圈称为环。 $\{V_1, V_2\}$ 为顶点集合 V 的 1 个划分, 集合 C 是由边集构成的集合, 这些边的 1 个顶点在 V_1 中, 另 1 个顶点在 V_2 中, 这时, 称集合 C 为割。1 个边的割称为桥。图 G 和 H 是 2 个给定的图, u 为图 G 中的顶点, v 为图 H 中的顶点, 当将顶点 u 和 v 等同于相同的顶点 ω 时组成 1 个新图 GH , 称图 GH 为图 G 与 H 的一点连。

定义 1 设 $G = (V, E)$ 是图, 则图 G 的 Tutte 多项式为

(1) (删除—收缩) 若 e 不是环, 也不是桥, 则

$$T(G; x, y) = T(G - e; x, y) + T(G/e; x, y)$$

(2) $T(I; x, y) = x$, $T(L; x, y) = y$, 其中 I 为只有 1 条边的桥, L 为 1 个环。

Tutte 多项式有许多有趣的性质, 这里介绍其中的 1 个。

性质 1 G 和 H 为给定的 2 个图, $G \cup H$ 表示 2 个图的并; GH 表示 2 个图的一点连, 那么

$$T(G \cup H) = T(G)T(H)$$

$$T(GH) = T(G)T(H)$$

2 碳纳米管状图

碳纳米管的结构图是一类很精美的数学意义上的图。顶点就是碳原子, 原子间的键可看成是图的边, 用 t 种颜色给碳纳米管的顶点着色是本文感兴趣的问题。但本文更感兴趣计算 Tutte 多项式, 因为由 Tutte 多项式可以得到着色多项式。

本文之所以研究这类图, 最开始的动机是想研究碳纳米管状图的顶点着色问题, 进而研究它的 Tutte 多项式。但由于计算的复杂度和时间问题, 进一步的工作尚待以后进一步探讨。

收稿日期: 2010-05-17

基金项目: 国家自然科学基金(10671009)

第一作者: 男, 1984 年生, 硕士生

* 通讯联系人

E-mail: jianggf@mail.buct.edu.cn

2.1 碳纳米管状图转化为平面图

为了研究由六边形构成的管状图的 Tutte 多项式,本文沿着该管状图竖直方向的一条线将其分开,分开后的 A_1, A_2, A_3, A_4 可参见图 1,其中实心小圈点代表图的顶点,黑线代表顶点之间的边,两条虚线表示该图沿这两条线是连接的。如图 1(c)所示,分别在两条虚线上的顶点 v_1, v_1 和 v_2, v_2 以及边 e, e 分别表示同一个顶点或边。

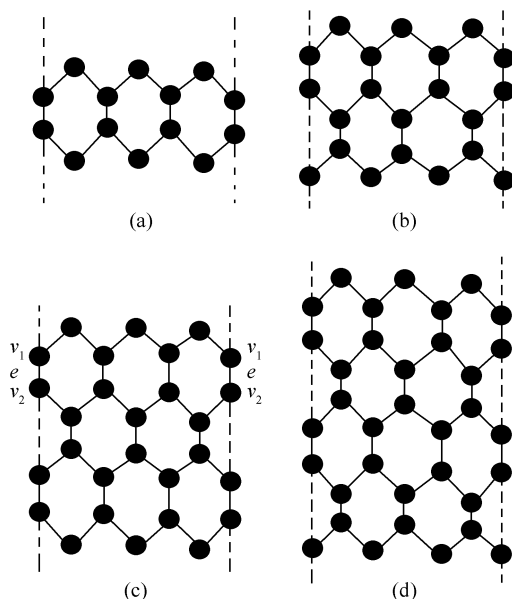


图 1 沿着竖直方向的一条线将管状图分开

Fig.1 Separate tube graphs along the vertical direction

从管的一个顶点出发,沿着非竖直方向移动,从每一个顶点出发都能回到原来的出发顶点,且经过的顶点数均为 6,即为 6 个顶点的圈,称这 6 个顶点的圈为横向圈;连接横向圈之间的边称为竖边。如图 1(c)所示,沿着左边虚线上顶点 v_1 沿非竖直方向向右移动回到右边虚线的顶点 v_1 时恰好经过一个 6 个顶点的圈,它就是一个过顶点 v_1 的横向圈,类似方法可得到一个过顶点 v_2 的横向圈。竖直方向连接顶点 v_1, v_2 的边 e 就是一条竖边,它连接过顶点 v_1 的横向圈和过顶点 v_2 的横向圈。

显然管状图是由横向圈和竖边所构成。记 A_n 为由 $n+1$ 个横向圈和 $3n$ 个竖边所构成的图。每两个相邻的横向圈之间均有 3 个对称的竖边相连,从最里层开始每增加一个横向圈它的竖边转换一次顶点。其实,一个管状图是一个平面图,画在平面上的管状图 A_1, A_2, A_3, A_4 可参见图 2。为方便起见,记 A_0 为一个有 6 个顶点的圈。

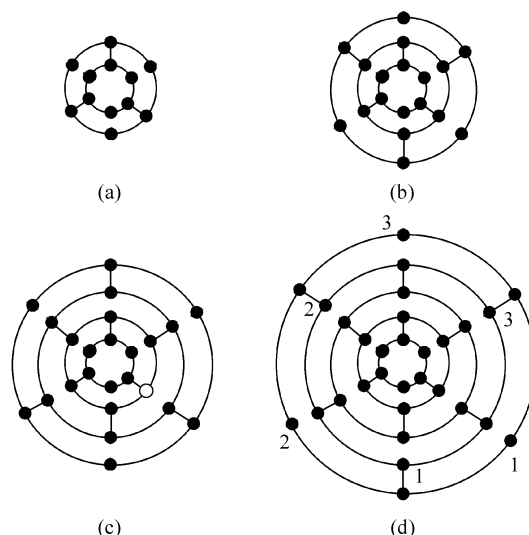


图 2 碳纳米管状图转化为平面图

Fig.2 Transformation of carbon nanotube-like graphs to plane graphs

2.2 为管状图最外层两个横向圈的一些顶点排序

本文给图 A_n 的横向圈上的顶点 1 个序。首先,定义最外层横向圈上顶点度为 2 的顶点的序。为方便起见,不妨先选定 1 个度为 2 的顶点将它的顶点序记为 1,按顺时针方向旋转,每遇到 1 个度为 2 的顶点,就把它序记为上 1 个序号加 1。这样就得到图 A_n 最外层的横向圈顶点度为 2 的顶点 1 个顺序。其次,为次外层的横向圈与最外层横向圈有公共竖边的顶点排序。先选定 1 个与最外层横向圈有公共竖边的顶点将它的顶点序记为 1,按顺时针方向旋转,每遇到 1 个与最外层横向圈有公共竖边的顶点,就把它序记为上 1 个序号加 1。如图 2(d)所示,分别得到图 A_4 上最外层横向圈度为 2 的顶点和次外层与最外层横向圈有公共竖边的顶点的序。

2.3 在管状图的基础上引进一些新概念

为了后面的方便,本文引进一个新的集合的概念,这些集合是对图 A_n 最外层横向圈度为 2 的顶点上增加边,记为 $P(i, i+j)^k A_n$,这里的 k 表示在顶点 $i, i+j$ 上增加 k 个边,当 $k=1$ 时,简记为 $P(i, i+j) A_n$ 。当 $i+j \leq n$ 时,它表示在图 A_n 上将顶点序为 $i, i+j$ 的顶点连接,增加图的 k 条新边;当 $i+j > n$ 时,它表示在图 A_n 上将顶点序为 $i, i+j-n$ 的顶点连接,增加图的 k 条新边。图 $P(1, 2)A_4, P(1, 2)^2 A_4, \sum_{i=1}^3 P(i, i+1)A_4$ 如图 3 所示。

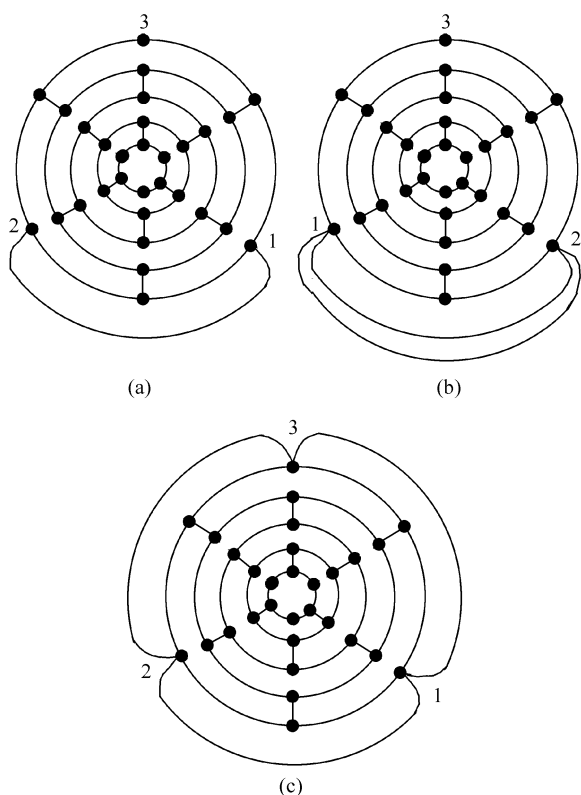


图 3 在碳纳米管状图的基础上引进一些新图

Fig. 3 New graphs obtained on the basis of carbon nanotube-like graphs

3 碳纳米管状图的 Tutte 多项式

图 A_n 如图 4 所示,为了计算的方便,在计算图 A_n 的 Tutte 多项式之前,先给图 A_n 最外层的横向圈及竖边中的所有边一个序。首先,任意选定 1 个最外层的竖边记为 e_1 ;按顺时针方向每遇到最外层的 1 个竖边都将原来边的序号加 1;这样就有了图 A_n 最外层竖边的边的序。接下来,为图 A_n 最外层的横向圈的边一个序。选定边 e_1 顺时针方向的第 1 个边为 e_4 ,在该横向圈上按顺时针方向转动,每遇到 1 个边就将原来的边的序号加 1,这样就得到了管状

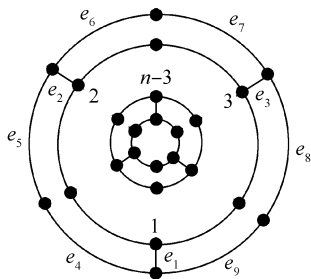
图 4 图 A_n Fig. 4 The graph of A_n

图 A_n 的最外层横向圈及竖边边的 1 个序。如图 4 所示得到图 A_n 最外层竖边及横向圈的 1 个序。

本文主要用删除-限制法则来计算 A_n 的 Tutte 多项式,发现了几类基本图形(称为基图),并用这些基本图形的 Tutte 多项式可以得出 A_n 的 Tutte 多项式的递推公式,再用计算机辅助可以给出 A_n 的 Tutte 多项式的表达式。

定理 2.1

当 $n=0$ 时

$$T(A_0) = T(M_6) = x^5 + x^4 + x^3 + x^2 + x + y$$

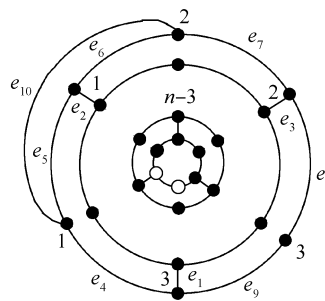
当 $n \geq 1$ 时,图 A_n 的 Tutte 多项式的基图为

$$A_{n-1}, P(1,2)A_{n-1}, P(1,2)^2A_{n-1}, \sum_{i=1}^2 P(i, i+1)A_{n-1}, \sum_{i=1}^3 P(i, i+1)A_{n-1}, \text{ 且}$$

$$T(A_n) = (x^6 + 3x^5 + 6x^4 + 7x^3 + 6x^2 + xy + 2x + 2y)T(A_{n-1}) + (3x^3 + 6x^2 + 6x)T(P(1,2)A_{n-1}) + 3T(P(1,2)^2A_{n-1}) + 3xT\left(\sum_{i=1}^2 P(i, i+1)A_{n-1}\right) + T\left(\sum_{i=1}^3 P(i, i+1)A_{n-1}\right)$$

以下的 4 个定理主要是计算定理 2.1 中的几个基图的 Tutte 多项式的递推公式的。

图 $P(1,2)A_n$ 如图 5 所示,此时将连接顶点 1,2 的边记为 e_{10} ,这样就得到了图 $P(1,2)A_n$ 最外层横向圈,竖边及连接顶点 1,2 边的一个序。

图 5 图 $P(1,2)A_n$ Fig. 5 The graph of $P(1,2)A_n$

定理 2.2

当 $n=0$ 时

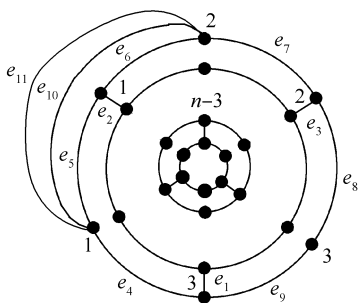
$$T(P(1,2)A_0) = x^5 + 2x^4 + x^3y + 2x^3 + x^2y + 2x^2 + 2xy + y^2 + x + y$$

当 $n \geq 1$ 时,图 $P(1,2)A_n$ 的 Tutte 多项式的基图

$$\text{为 } A_n, A_{n-1}, P(1,2)A_{n-1}, P(1,2)^2A_{n-1}, \sum_{i=1}^2 P(i, i+1)A_{n-1}, \sum_{i=1}^3 P(i, i+1)A_{n-1}, \text{ 且}$$

$$T(P(1,2)A_n) = T(A_n) + (x^5 + x^4y + 3x^4 + 3x^3y + 6x^3 + 5x^2y + xy^2 + 5x^2 + 4xy + 2y^2 + 2x + 2y)T(A_{n-1}) + (2x^2y + 4x^2 + 4xy + 4x)T(P(1,2)A_{n-1}) + (x + 3y + 3)T(P(1,2)^2A_{n-1}) + x(y+1)T\left(\overset{2}{P}(i, i+1)A_{n-1}\right) + (y+1)T\left(\overset{3}{P}(i, i+1)A_{n-1}\right)$$

图 $P(1,2)^2A_n$ 如图 6 所示,它是在图 A_n 的基础上在顶点 1,2 上增加了两个边,其他的序与图 A_n 的排序方法一样,分别将这两条边记为 e_{10}, e_{11} 。

图 6 图 $P(1,2)^2A_n$ Fig. 6 The graph of $P(1,2)^2A_n$

定理 2.3

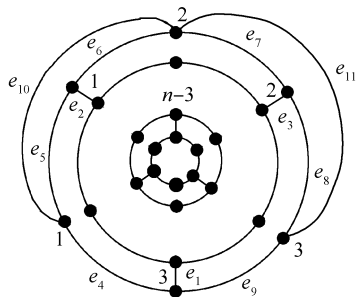
当 $n=0$ 时

$$T(P(1,2)^2A_0) = x^5 + x^4y + x^3y^2 + 2x^4 + 2x^3y + x^2y^2 + 2x^3 + 2x^2y + 2xy^2 + y^3 + 2x^2 + 2xy + y^2 + x + y$$

当 $n \geq 1$ 时,图 $P(1,2)^2A_n$ 的 Tutte 多项式的基图为 $A_n, P(1,2)A_n$, 且

$$T(P(1,2)^2A_n) = (y+1)T(P(1,2)A_n) - yT(A_n)$$

图 $\overset{2}{P}(i, i+1)A_n$ 如图 7 所示,它是在图 A_n 的基础上在顶点 1,2 及 2,3 增加了两条边,其他的序

图 7 图 $\overset{2}{P}(i, i+1)A_n$ Fig. 7 The graph of $\overset{2}{P}(i, i+1)A_n$

与图 A_n 的排序方法一样,从而只需对增加的两个边一个序号即可,分别将这两条边记为 e_{10}, e_{11} 。

定理 2.4

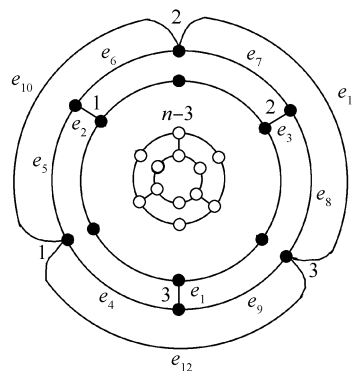
当 $n=0$ 时

$$T\left(\overset{2}{P}(i, i+1)A_0\right) = x^5 + 3x^4 + 2x^3y + 4x^3 + 5x^2y + 3xy^2 + y^3 + 3x^2 + 4xy + 2y^2 + y + x$$

当 $n \geq 1$ 时,图 $\overset{2}{P}(i, i+1)A_n$ 的 Tutte 多项式的基图为 $A_n, P(1,2)A_n, A_{n-1}, P(1,2)A_{n-1}, \overset{2}{P}(i, i+1)A_{n-1}$, 且

$$T\left(\overset{2}{P}(i, i+1)A_n\right) = 2T(P(1,2)A_n) - T(A_n) + (3x+1)(y+1)^2T(P(1,2)A_{n-1}) + (x^4 + 2x^3y + 2x^3 + x^2y^2 + 5x^2y + xy^2 + 3x^2 + 2xy + x)T(A_{n-1}) + (y+1)^3T\left(\overset{2}{P}(i, i+1)A_{n-1}\right)$$

图 $\overset{3}{P}(i, i+1)A_n$ 如图 8 所示,它是在图 A_n 的基础上在顶点 1,2,3 的任意两个顶点之间增加 1 个变,共增加 3 个边,其他的序与图 A_n 的排序方法一样,从而只需对增加的 3 个边 1 个序号即可,分别将这 3 条边记为 e_{10}, e_{11}, e_{12} 。

图 8 图 $\overset{3}{P}(i, i+1)A_n$ Fig. 8 The graph of $\overset{3}{P}(i, i+1)A_n$

定理 2.5

当 $n=0$ 时

$$T\left(\overset{3}{P}(i, i+1)A_0\right) = x^5 + 4x^4 + 4x^3y + 2x^2y^2 + 3xy^3 + y^4 + 5x^3 + 8x^2y + 6xy^2 + 2y^3 + 4x^2 + 6xy + 4y^2 + 2x + 2y$$

当 $n \geq 1$ 时图 $\overset{3}{P}(i, i+1)A_n$ 的 Tutte 多项式的

基图为 $A_n, P(1, 2)A_n, \overset{2}{P}(i, i+1)A_n$, 且

$$T\left(\overset{3}{P}(i, i+1)A_n\right) = (2+y)T\left(\overset{2}{P}(i, i+1)A_n\right) - (2y+1)T(P(1, 2)A_n) + yT(A_n)$$

4 用 Maple 计算管状图的 Tutte 多项式

对于任意的 $n \geq 1$, Maple 程序 Tutte 用来计算图 A_n 的 Tutte 多项式。

```
n := 3;
A := array[1 .. n];
B := array[1 .. n];
C := array[1 .. n];
E := array[1 .. n];
F := array[1 .. n];
A[1] := x^5 + x^4 + x^3 + x^2 + x + y;
B[1] := x^5 + 2x^4 + x^3y + 2x^3 + x^2y + 2x^2 + 2xy +
y^2 + x + y;
C[1] := x^5 + x^4y + x^3y^2 + 2x^4 + 2x^3y + x^2y^2 + 2x^3 +
2x^2y + 2xy^2 + y^3 + 2x^2 + 2xy + y^2 + x + y;
E[1] := x^5 + 3x^4 + 2x^3y + 4x^3 + 5x^2y + 3xy^2 + y^3 +
3x^2 + 4xy + 2y^2 + x + y;
F[1] := x^5 + 4x^4 + 4x^3y + 3x^2y^2 + 3xy^3 + y^4 + 6x^3 +
9x^2y + 6xy^2 + 2y^3 + 4x^2 + 6xy + 3y^2 + x + y;
for i from 2 to n do
  A[i] := (x^6 + 3x^5 + 6x^4 + 7x^3 + 6x^2 + xy + 2x +
2y)A[i-1] + (3x^3 + 6x^2 + 6x)B[i-1] + 3C[i-1] +
3xE[i-1] + F[i-1];
  B[i] := A[i] + (x^5 + x^4y + 3x^4 + 3x^3y + 6x^3 +
5x^2y + xy^2 + 5x^2 + 4xy + 2y^2 + 2x + 2y)T(A_{n-1}) +
(2x^2y + 4x^2 + 4xy + 4x)B[i-1] + (x + 3y + 3)C[i-1] +
x(y+1)E[i-1] + (y+1)F[i-1];
  C[i] := (y+1)B[i] - yA[i];
  E[i] := 2T(P(1, 2)A_n) - T(A_n) + (x^4 + 3x^3y +
3x^2y^2 + xy^3 + 2x^3 + 6x^2y + 3xy^2 + 3x^2 + 3xy + x)T
(A_{n-1}) + (3xy^2 + y^3 + 6xy + 3y^2 + 3x + 3y + 1)T(P
(1, 2)A_{n-1}) + (y^3 + 3y^2 + 3y + 1)T(\overset{2}{P}(i, i+1)
A_{n-1})
  F[i] := (2+y)E[i] - (2y+1)B[i] + yA[i];
end do;
sort(expand(A[n]));
```

如表 1 所示, 应用 Maple 程序得到 $n = 0, 1, 2$ 时

图 A_n 的 Tutte 多项式。

由 $\chi(G; x) = (-1)^{r(E)} x \kappa(G) T(G; 1-X, 0)^{[2]}$ 得到图的着色多项式。如表 2 所示, $n = 0, 1, 2$ 时图 A_n 的着色多项式。

表 1 $n = 0, 1, 2$ 时图 A_n 的 Tutte 多项式
Table 1 The Tutte polynomial of the graph A_n
for $n = 0, 1, 2$

| 图 | Tutte 多项式 |
|-------|---|
| A_0 | $x^5 + x^4 + x^3 + x^2 + x + y$ |
| A_1 | $x^{11} + 4x^{10} + 10x^9 + 20x^8 + 35x^7 + 5x^6y + 51x^6 + 15x^5y + 64x^5 + 36x^4y + 6x^3y^2 + 64x^4 + 56x^3y + 21x^2y^2 + 6xy^3 + y^4 + 47x^3 + 54x^2y + 25xy^2 + 5y^3 + 21x^2 + 25xy + 8y^2 + 4x + 4y$ |
| A_2 | $x^{17} + 7x^{16} + 28x^{15} + 84x^{14} + 210x^{13} + 9x^{12}y + 453x^{12} + 54x^{11}y + 861x^{11} + 201x^{10}y + 12x^9y^2 + 1452x^{10} + 552x^9y + 84x^8y^2 + 12x^7y^3 + 2x^6y^4 + 2175x^9 + 1197x^8y + 294x^7y^2 + 55x^6y^3 + 6x^5y^4 + 2884x^8 + 2118x^7y + 711x^6y^2 + 168x^5y^3 + 36x^4y^4 + 6x^3y^5 + 3367x^7 + 3148x^6y + 1383x^5y^2 + 426x^4y^3 + 104x^3y^4 + 21x^2y^5 + 6xy^6 + y^7 + 3405x^6 + 3888x^5y + 2101x^4y^2 + 772x^3y^3 + 237x^2y^4 + 68xy^5 + 11y^6 + 2895x^5 + 3868x^4y + 2438x^3y^2 + 1027x^2y^3 + 317xy^4 + 52y^5 + 1969x^4 + 2910x^3y + 1923x^2y^2 + 732xy^3 + 133y^4 + 982x^3 + 1464x^2y + 837xy^2 + 191y^3 + 308x^2 + 408xy + 144y^2 + 44x + 44y$ |

表 2 $n = 0, 1, 2$ 时图 A_n 的着色多项式
Table 2 The chromatic polynomial of the graph A_n for
 $n = 0, 1, 2$

| 图 | 着色多项式 |
|-------|--|
| A_0 | $x(x-1)^5 - x(x-1)^4 + x(x-1)^3 - x(x-1)^2 + x(x-1)$ |
| A_1 | $x(x-1)^{11} - 4x(x-1)^{10} + 10x(x-1)^9 - 20x(x-1)^8 + 35x(x-1)^7 - 51x(x-1)^6 + 64x(x-1)^5 - 64x(x-1)^4 + 47x(x-1)^3 - 21x(x-1)^2 + 4x(x-1)$ |
| A_2 | $x(x-1)^{17} - 7x(x-1)^{16} + 28x(x-1)^{15} - 84x(x-1)^{14} + 210x(x-1)^{13} - 453x(x-1)^{12} + 861x(x-1)^{11} - 1452x(x-1)^{10} + 2175x(x-1)^9 - 2884x(x-1)^8 + 3367x(x-1)^7 - 3405x(x-1)^6 + 2895x(x-1)^5 - 1969x(x-1)^4 + 982x(x-1)^3 - 308x(x-1)^2 + 44x(x-1)$ |

参考文献:

- [1] Tutte W T. A contribution to the theory of chromatic polynomials[J]. Math, 1954, 6: 80-91.

- [2] Ellis-Monaghan J A, Merino C. Graph polynomials and their applications I: The tutte polynomial. http://arxiv.org/PS_cache/arxiv/pdf/0803/0803.3079v2.pdf.
- [3] Ellis-Monaghan J A, Merino C. Graph polynomials and their applications II: Interrelations and Interpretations. http://arxiv.org/PS_cache/arxiv/pdf/0806/0806.4699v1.pdf.
- [4] Barany M. Computation of tutte polynomials[D]. Minnesota: University of Minnesota, 2005.
- [5] 初丽丽, 姜广峰. 一类图构型的 Orlik-Solomon 代数及 Tutte 多项式[J]. 北京化工大学学报: 自然科学版, 2009, 36(5): 116–120.
- Chu L L, Jiang G F. Orlik-Solomon algebras and Tutte Polynomials of a class of graphic arrangements[J]. Journal of Beijing University of Chemical Technology: Natural Science, 2009, 36(5): 116–120. (in Chinese)
- [6] Jin X A. Tutte Polynomials for two recursive families of graphs[J]. Journal of Mathematical Study, 2006, 39(4): 345–353.
- [7] Dohmen K, Pönitz A, Tittmann P. A new two-variable generalization of the chromatic polynomial[J]. Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science, 2003, 6: 69–90.

Tutte polynomials of a class of carbon nanotube-like graphs

LI AiMin JIANG GuangFeng

(School of Science, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

Abstract: Tutte polynomials of a special class of tubular graphs, carbon nanotube like graphs, are considered. Some basic graphs were formulated by the deletion-restriction process. The Tutte polynomials of the basic graphs serve as a basis of the target Tutte polynomial. A recursion formula for the Tutte polynomial of a tubular graph was obtained. The algorithm for calculating the Tutte polynomial of a specific tubular graph was realized by a Maple program.

Key words: carbon nanotube like graph; Tutte polynomial; Maple program